

**Tadeusz KWATER, Bogdan KWIATKOWSKI, Paweł KRUTYS,  
Ewa ŻESŁAWSKA**  
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**

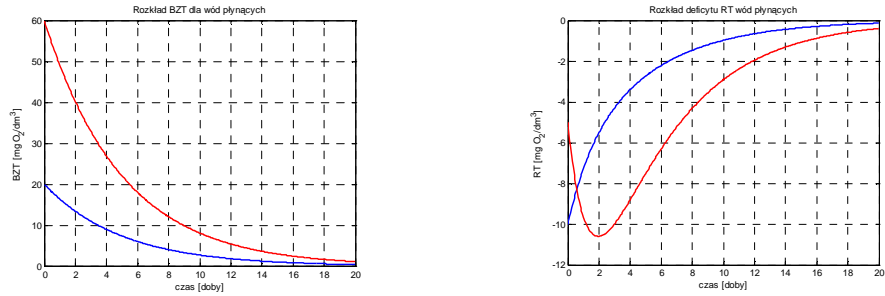
Do rozważań przyjęto następujące wskaźniki zanieczyszczeń wody, tj.: **Biochemiczne Zapotrzebowanie Tlenu (BZT)** oraz poziom **Rozpuszczony Tlen (RT)**. Zgodnie z równaniem różniczkowym kinetyki reakcji fizyczno-chemicznej pierwszego rzędu rozkłady BZT i RT przyjmują postać [Szymkiewicz 2000; Palczewski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

$$\frac{d}{dt} x_1(t) = -k_1 x_1(t) \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt} x_2(t) = -k_2 x_1(t) - k_3 x_2(t) + a, \quad (2)$$

w których:  $x_1 [mg/l]$  – stężenie zanieczyszczeń organicznych (BZT),  $x_2 [mg/l]$  – deficyt RT,  $t [doba]$  – czas,  $k_1 [doba^{-1}]$  – współczynnik szybkości reakcji,  $k_2 [doba^{-1}]$  – współczynnik szybkości wpływu BZT na RT,  $k_3 [doba^{-1}]$  – 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]:

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

gdzie:  $x$  – wektor reprezentujący zanieczyszczenia,  $D$  – współczynnik dyfuzji,  $\delta$  – 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.

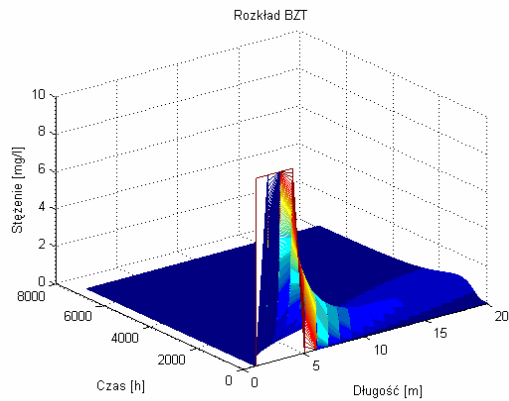
Do rozwiązania zagadnienia określonego zależnościami (6) i (7a), (7b), (7c) wykorzystano metodę różnic skończonych. Zapewnienie stabilności wymaga przyjęcia odpowiedniego kroku dyskretyzacji, który zapewni stabilność w obszarze rozwiązań, a także należy uwzględnić regułę dyfuzyjnej liczby Couranta [Kwater,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

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

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

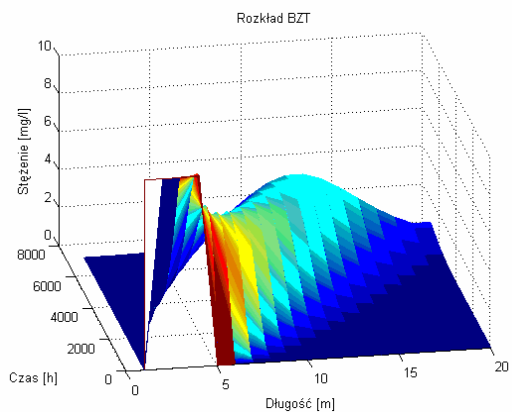
### 3. Rezultaty eksperymentów numerycznych

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.



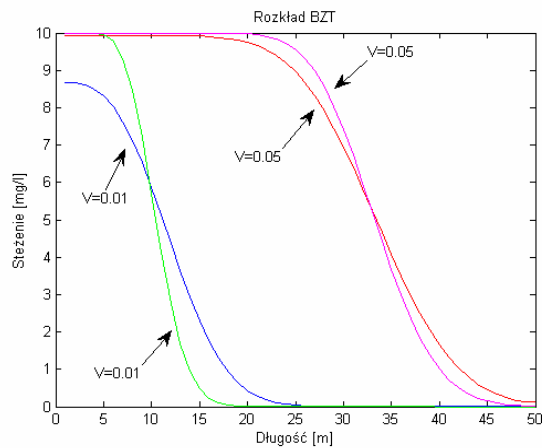
**Rys. 2. Rozkład BZT z dyfuzją i procesem samooczyszczania**

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.